6. A Variational Theory for the Reriodic Anderson Model

東理大・理工　小　口　明　秀

周期的アンダーソンモデルの基底状態の研究には現在三つの方法がある。$1/N_f$ 一展開の方法[1)]，摂動論[2)]，変分法[3)~6)]である。$1/N_f$ 一展開では分配関数を経路積分を用いてあらわし，積分計算には静的近似を用いる。この近似内で，繰込まれた f 一電子のエネルギー準位と混成マトリックス V を含む有効ハミルトニアンが得られる。摂動論では，f 電子の自己エネルギーを用いて，比熱や帯磁率が正確に求まっているが具体的な高次計算はまだ行なわれていない。変分法は Gutzwiller の変分法を周期的アンダーソンモデルに応用したもので，Brandow[3)] Rice-Ueda,[4)] Varma et. al[5)] がある。$1/N_f$ 一展開法も変分法も，f 一電子のエネルギーレベル E_f と混成マトリックス V に繰込みが行なわれるという点で，その繰込み因子の詳細は別として似た結果を得ている。ここでは周期的アンダーソンモデルに対する簡単な変分法を報告したい。次のハミルトニアンを考える。

$$H=\sum_{k\sigma}\varepsilon_k c^+_{k\sigma}c_{k\sigma}+\sum_{i\sigma}E_f\hat{n}_{fi\sigma}+V\sum_{i\sigma}(c^+_{i\sigma}f_{i\sigma}+f^+_{i\sigma}c_{i\sigma})$$
$$+U\sum_i\hat{n}_{fi\uparrow}\hat{n}_{fi\downarrow} \qquad (1)$$

以下では f 電子間のクーロン斥力が無限大のときを考える。変分法ではまず試行波動関数を必要とする。適当な試行関数を見出す為に $U=0$ のときと，$U\neq 0$ のときでエネルギーレベルに一対一対応があるとする Landau のフェルミ液体論を援用しよう。$U=0$ のとき(1)式は変換

$$c_{k\sigma}=v^0_{k\sigma}a^0_{k\sigma}+u^0_{k\sigma}b^0_{k\sigma} \qquad (2.\mathrm{a})$$

$$f_{k\sigma}=u^0_{k\sigma}a^0_{k\sigma}-v^0_{k\sigma}b^0_{k\sigma} \qquad (2.\mathrm{b})$$

によって対角化される。ここで $a^0_{k\sigma}$，$b^0_{k\sigma}$ は上下二つのバンド各々に対する電子の消滅演算子である。各サイトの全電子数 n が $1<n<2$ のとき，電子は下のバンドに詰まっているから基底状態の状態ベクトル，$|\phi_0>$ は，

$$|\phi_0>=\prod_{k<k_{\mathrm{F}},\sigma}b^{0+}_{k\sigma}|0> \qquad (3)$$

であらわされる。Uを0から徐々に大きくしてゆくとき，エネルギーレベルが一対一対応を保持していると仮定すると

$$c_{k\sigma} = v_{k\sigma}\, a_{k\sigma} + u_{k\sigma}\, b_{k\sigma} \tag{4a}$$

$$f_{k\sigma} = u_{k\sigma}\, a_{k\sigma} - v_{k\sigma}\, b_{k\sigma} \tag{4b}$$

の正準変換が考えられる。$u_{k\sigma}$, $v_{k\sigma}$ は変分パラメータであり，$a_{k\sigma}$, $b_{k\sigma}$ は上下二つのバンドの準粒子に対する消滅演算子である。$U \neq 0$のために，バンドの形が$U=0$のときと異なるから$U=0$のときの $a^{0}_{k\sigma}$, $b^{0}_{k\sigma}$ と区別して添字の(0)をとってある。この $b_{k\sigma}$ を用いて，$U=\infty$のときの基底状態の試行状態ベクトル $|\psi>$ を

$$|\psi> = \prod_i P_i\, |\psi_0> \tag{5}$$

$$|\psi_0> = \prod_{k<k_F} b^{+}_{k\uparrow}\, b^{+}_{k\downarrow}\, |0> \tag{6}$$

$$P_i = 1 - (1 + \eta_\uparrow + \eta_\downarrow)\hat{\eta}_{fi\uparrow}\,\hat{\eta}_{fi\downarrow} + \eta_\uparrow\,\hat{\eta}_{fi\uparrow} + \eta_\downarrow\hat{\eta}_{fi\downarrow} \tag{7}$$

であらわす。ここで $|\psi_0>$ は$U=\infty$ のときの準粒子のガス状態をあらわし，P_i は，$U=\infty$によって同一サイトにf電子が2個入る事を禁じるための演算子である。$\eta_\uparrow$，$\eta_\downarrow$ は $|\psi_0>$ と $|\psi>$ とで各サイトの全電子数が保存するという要請より決定されるパラメータである。すなわち

$$<\psi|\,\hat{n}_{fi\sigma} + c^{+}_{i\sigma}\, c_{i\sigma}\,|\psi>/<\psi/\psi> = <\psi_0\,|\hat{n}_{fi\sigma} + c^{+}_{i\sigma}\, c_{i\sigma}\,|\psi_0>\ 。 \tag{8}$$

$|\psi>$ での物理量の期待値を計算するために次の様な one-site 近似を行なう。O_i をi－site に関する物理量として，期待値を

$$<\psi|\,O_i\,|\psi>/<\psi|\psi> \rightarrow <\psi_0\,|P_i\,O_i\,P_i\,|\psi_0>/<\psi_0\,|P^2_i\,|\psi_0> \tag{9}$$

として計算する。(8)をこの近似によって書きなおすと

$$\frac{1}{<P^2>}\Big[\, n_{f\sigma}\,(1 - n_{f\text{-}\sigma})(1 + \eta_\sigma)^2 + <c^{+}_{i\sigma}\, c_{i\sigma}><P^2>$$
$$+ <f^{+}_{i\sigma}\, c_{i\sigma}><c^{+}_{i\sigma}\, f_{i\sigma}>\{\, n_{f\text{-}\sigma}\,(1+\eta_\sigma)^2 + (1 - n_{f\text{-}\sigma})(1-(1+\eta_\sigma)^2)\}\Big]$$
$$= n_{f\sigma} + <c^{+}_{i\sigma}\, c_{i\sigma}>$$

となる。ここで

$$<P^2> = (1-n_{f-\sigma})(1-n_{f\sigma}) + \sum_{\sigma} n_{f\sigma}(1-n_{f-\sigma})(1+\eta_\sigma)^2 \tag{11}$$

で$\langle A\rangle$は$\langle A\rangle = \langle\psi_0|A|\psi_0\rangle$ である。又,

$$n_{f\sigma} = \frac{1}{N}\sum_{k<k_\mathrm{F}} v_{k\sigma}^2 \tag{12}$$

である。(10)式より η_σ は

$$(1+\eta_\sigma)^2 = (1-n_{f\sigma})/(1-n_f) \tag{13}$$

と求まる。$n_f = n_{f\uparrow} + n_{f\downarrow}$ 。

系の基底状態のエネルギー E_0 は, one-site 近似の下で

$$\begin{aligned} E_0 &= <\psi|H|\psi>/<\psi|\psi> \\ &= \sum_{\sigma}\sum_{k<k_\mathrm{F}} [\varepsilon_k u_{k\sigma}^2 + E_f v_{k\sigma}^2 - 2\widetilde{V}_\sigma u_{k\sigma} v_{k\sigma}] \end{aligned} \tag{14}$$

となる。ここで

$$\widetilde{V}_\sigma = V[(1-n_f)/(1-n_{f\sigma})]^{1/2} \equiv V r_\sigma \tag{15}$$

である。V に対する繰込みファクター r_σ は Rice-Ueda[4] や Fazekas[6] と同じである。ここでは r_σ は $v_{k\sigma}$ の関数になっている。(4a, b) が正準変換であるためには $u_{k\sigma}^2 + v_{k\sigma}^2 = 1$ が成立しなければならない。この条件の下で(14)の極少を与える $u_{k\sigma}$, $v_{k\sigma}$ を求める。Lagrange の未定乗数法より

$$G \equiv E_0 - \sum_{k\sigma} \lambda_{k\sigma}(u_{k\sigma}^2 + v_{k\sigma}^2 - 1) \tag{16}$$

を極少にする $\lambda_{k\sigma}$, $u_{k\sigma}$, $v_{k\sigma}$ を求めると

$$\lambda_{k\sigma}^{\pm} = [\varepsilon_k + E_f - \mu_\sigma \pm \sqrt{(\varepsilon_k - E_f + \mu_\sigma)^2 + 4\widetilde{V}_\sigma^2}]/2 \tag{17}$$

$$\begin{pmatrix} u_{k\sigma} \\ v_{k\sigma} \end{pmatrix} = \frac{[\{(\varepsilon_k - E_f + \mu_\sigma)^2 + 4\widetilde{V}_\sigma^2\}^{1/2} \mp (\varepsilon_k - E_f + \mu_\sigma)]^{1/2}}{\sqrt{2}[(\varepsilon_k - E_f + \mu_\sigma)^2 + 4\widetilde{V}_\sigma^2]^{1/4}} \tag{18}$$

で $$\mu_\sigma = -\{n_{f-\sigma} F_\sigma/(1-n_{f\sigma}) + F_{-\sigma}\}/(1-n_f) \tag{19}$$

$$F_\sigma = (\widetilde{V}_\sigma / N) \sum_{k<k_F} u_{k\sigma}\, v_{k\sigma}$$

である。μ_σ は $\widetilde{V}_\sigma$ の $v_{k\sigma}$ の微分から生じたものである。(17)より $U=\infty$ のときは，$U=0$ のときの V と E_f が $\widetilde{V}_\sigma = V r_\sigma$ と $\widetilde{E}_{f\sigma} = E_f - \mu_\sigma$ に繰込まれた事が分る。以下簡単のため伝導電子の分散関係 ε_k を－1から1迄の線形とする。site 当りの f 電子数 $n_{f\sigma}$ は

$$n_{f\sigma} = \frac{1}{N} \sum v_{k\sigma}^2 = \frac{1}{2}\,(\varepsilon_0 - E_f + \mu_\sigma) \tag{20}$$

である。ここで $|E_f| \gg V$，$n_{f\sigma} \simeq \frac{1}{2}$ とした。ε_0 は Fermi エネルギーである。(19)より

$$\mu_\sigma \equiv \mu_0 = -2V^2 \ln[\,\varepsilon_0 / 2V^2\,(1 - n_f)\,] \tag{21}$$

(20)，(21) より

$$1 - n_f = \frac{\varepsilon_0}{2V^2}\ \exp\left[\,-\frac{\varepsilon_0 - E_f - 1}{2V^2}\right] \tag{22}$$

(20) ～ (22) の結果は Rice-Ueda,[4] Fazekas[6] と同じである。

One-site 近似では(13)を(10)に代入して，容易に

$$<\psi|\hat{n}_{fi\sigma}|\psi>/<\psi|\psi> = <\psi_0|\hat{n}_{fi\sigma}|\psi_0>$$

が成立していることが分る。従って one-site 近似では $|\psi_0>$ と $|\psi>$ の f 電子数が保存されていることになる。これは Rice-Ueda が $|\psi>$ に課した条件である。

系の基底状態のエネルギーは

$$\begin{aligned} E_0 &= \sum_\sigma \sum_{k<k_F} (\lambda_{k\sigma}^- + \mu_0\, v_{k\sigma}^2) \\ &= \frac{1}{2}\,(\varepsilon_0^2 - 1) + \frac{1}{2}\, n_f^2 - \varepsilon_0\, n_f + E_f\, n_f - \widetilde{V}_0^2 \ln \frac{\varepsilon_0}{V^2} - \widetilde{V}^2 \end{aligned} \tag{23}$$

である。又 $V=0$ と $V \neq 0$ とのエネルギー差，即ち凝集エネルギー E_c は

$$\begin{aligned} E_c &= E(V) - E(V=0) \\ &= -2V^2 (1 - n_f) = -\varepsilon_0 \exp\left(-\frac{\varepsilon_0 - E_f - 1}{2V^2}\right) \end{aligned} \tag{24}$$

となる。exp の肩の因子は1個の不純物の近藤問題のときに比して2だけ小さい。これは1個の不純物のときの変分法でも同様であり，変分近似に由来している[7]と思われる。

準粒子のエネルギーレベルは

$$|\psi_{k'\sigma'}> = \Pi P_i \ b^{+}_{k'\sigma'}|\psi_0> \qquad (k' > k_{\mathrm{F}})$$

を用いて

$$\xi_{k'\sigma'} = <\psi_{k'\sigma'}|H|\psi_{k'\sigma'}>/<\psi_{k'\sigma'}|\psi_{k'\sigma'}> - E_0\,(N+1)$$

であらわされる。$k' \simeq k_{\mathrm{F}}$ のときは one-site 近似で

$$\xi_{k'\sigma'} \simeq \lambda^{-}_{k'\sigma'} - \lambda^{-}_{k_{\mathrm{F}}} \tag{25}$$

を得る。 $k' \simeq k_{\mathrm{F}}$ で準粒子スペクトルは $\lambda^{-}_{k'\sigma'}$ となる。準粒子の状態密度 $\rho(\lambda)$ は

$$\rho(\lambda) = \frac{\mathrm{d}\,\varepsilon}{\mathrm{d}\,\lambda} = \rho_s + \rho_f \tag{26}$$

で, ρ_s, ρ_f は伝導電子, f 電子の状態密度で各々

$$\rho_s = \rho(\lambda)\,u^2_{k\sigma} = 1, \quad \rho_f = \rho(\lambda)\,v^2_{k\sigma} = \widetilde{V}^2_\sigma/(\lambda - E_f + \mu_\sigma)^2 \tag{27}$$

である。 $\rho_s = 1$ であるから，クーロン斥力 U は s 電子の状態密度を変え得ない事が分る。電子の有効質量 m^* は

$$m^* = \rho(\lambda) = (1 - n_{f\sigma})/V^2(1 - n_f)$$

で $n_f \simeq 1$ で m^* は大きい。

One-site 近似下で電荷帯磁率は 1 である。近藤領域での帯磁率は

$$\chi_s^{-1} = 2(1 - n_f)\mu_0 < 0$$

である。 $\chi_s < 0$ は常磁性相の不安定を示し, Rice-Ueda と同じである。 価数揺動領域では

$$\chi_s = 2\left(1 + \frac{V}{2}\right) > 0$$

で常磁性相は安定で, Wilson 比は

$$\chi_s/\rho = 1 + \frac{V}{2}$$

となる。

以上我々は Landau のフェルミ液体論の「連続の原理」を用いて変分の試行関数を定め，期

待値の計算には one-site 近似を用いた。この近似内で結果は Rice-Ueda と一致している。実際の系では軌道縮退があり，これを取入れることは今後の問題である。

最后に芳田奎氏と物性研の斯波弘行氏に多くの議論をしていただきました。深く感謝致します。

References

1) N. Read and D.M. Newns, Solid State Commun. **52** (1984), 993.
P. Coleman, Phys. Rev. **B29** (1984), 3035. See Reference of Ref. 3.
2) K. Yamada and K. Yosida, in *"Electron Correlation and Magnetism in Narrow Band Systems"*, ed. by T. Moriya (Springer-Verlag, Berlin, 1981) p210, and in *"Theory of Heavy Fermions and Valence Fluctuations"*, ed. by T. Kasuya and T. Saso (Springer - Verlag, Berlin, 1985) p183.
3) B. H. Brandow, Phys. Rev. **B33** (1986), 215.
4) T. M. Rice and K. Ueda, Phys. Rev. Lett. **55** (1985), 995, 2093.
5) C. M. Varma, W. Weber and L. J. Randall, Phys. Rev. **33** (1986), 1015.
6) P. Fazekas, to be published.
7) A. Yoshimori, Intern. J. Magnetism. **4** (1973), 93.

7. 自己無撞着摂動法による アンダーソン格子の状態密度

東北大・理，工* 金 昌一，倉本義夫*，糟谷忠雄

高濃度近藤系の f 電子の特性は，高温において希薄系と類似の近藤効果を示すこと，低温において近藤状態間の干渉効果によって重い遍歴電子として振舞うことである。

本研究は高温からのアプローチとして，第1に近藤効果がサイト間相互作用によりどう影響されるか調べること，第2に1サイト的揺動状態から重い電子の状態へのクロスオーバーの性質を理解するねらいを持つ。そのためにフェルミ準位付近の電子状態だけではなく，近藤温度 T_K を含む広い範囲をカバーできる理論として，既に希薄系で成功を収めた自己無撞着摂動理論を格子系へ拡張した。